



TITLE:

非線形格子振動における誘導現象 :
部分系の相空間構造と安定性(複雑
な多谷ポテンシャルエネルギー面
上で生起する動力学的諸問題-力学
的決定性と統計性の中間領域を探
る(第2回)-,研究会報告)

AUTHOR(S):

篠原, 晋

CITATION:

篠原, 晋. 非線形格子振動における誘導現象 : 部分系の相空間構造と安定性(複雑な多谷ポテンシャルエネルギー面上で生起する動力学的諸問題-力学的决定性と統計性の中間領域を探る(第2回)-,研究会報告). 物性研究 2002, 78(4): 444-448

ISSUE DATE:

2002-07-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/97256>

RIGHT:

非線形格子振動における誘導現象

～ 部分系の相空間構造と安定性 ～

篠原 晋 (早大理工)

1 はじめに

非線形格子振動では、初期に規準モードの一部のグループを励起したときに、しばらくの間それらのモードにエネルギーの大部分が留まり続ける現象が観察される。この現象は数値実験により発見され、格子振動における誘導現象と呼ばれている [1]。誘導現象は、初期に単一モードを励起した場合が詳しく調べられており、時間発展の初期の段階では、励起モード以外のモードの運動方程式が Mathieu 方程式で表され、共鳴条件を満たすモードの指数成長が、モード間の活発なエネルギー交換を導くことが示されている [2, 3]。

誘導現象の特色は、時間発展の初期段階において、エネルギーの大部分を担う部分系とそれ以外の残りの系に明確に分離できることにある。このような分離が可能なのは、非線形格子振動のハミルトニアン構造と初期条件の特殊性を反映している。後に詳しく述べるように、初期に単一モードを励起すると、その運動は全系のハミルトニアン的一部分を切り出した簡約ハミルトニアンになることが言える [4]。この簡約ハミルトニアンが、誘導現象においてエネルギーの大半を担う部分であり、その性質は全系の自由度の数や初期に励起するモードによって変わってくる。簡約ハミルトニアンは、一般には初期に励起したモードの変数だけでは閉じず、それ以外のモード変数も含む。

これまでの誘導現象の研究では、エネルギーの大半を担う部分系を一自由度と仮定することが多かったが [2, 3]、この仮定は、簡約ハミルトニアンが一自由度になる場合は厳密に成り立ち、それ以外の場合は近似になる。簡約ハミルトニアンが一自由度の場合、その解は周期解だけであるが、自由度 2 以上の場合、軌道のヴァリエーションが増し、カオス軌道も存在し得る。本報告では、簡約ハミルトニアンが二自由度になる条件を求め、二自由度部分系の相空間構造と、部分系軌道の全系における安定性を調べた結果を述べる。

2 FPU- β モデルにおける簡約ハミルトニアン

非線形格子振動のモデルでは、非線形項の取り方、境界条件の設定で幾つかのヴァリエーションがあるが、ここでは、4 次の非線形項を持つ一次元 FPU- β モデルを考え、境界粒子は固定する [5]。そのハミルトニアンは次式で与えられる。

$$H = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N-1} p_j^2 + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (q_j - q_{j-1})^2 + \frac{\beta}{4} \sum_{j=1}^N (q_j - q_{j-1})^4 \quad (1)$$

ここで q_j は j 粒子の平衡点からの変位、 p_j は q_j に共役な運動量である。また、可動粒子数は $N-1$ とし、両端固定条件から $q_0 = q_N = 0$ とする。ハミルトニアン (1) は、規準座標への変換

$$q_j = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{k=1}^{N-1} Q_k \sin\left(\frac{\pi j k}{N}\right), \quad p_j = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{k=1}^{N-1} P_k \sin\left(\frac{\pi j k}{N}\right), \quad j = 1, \dots, N-1 \quad (2)$$

によって、角速度

$$\omega_k = 2 \sin \left(\frac{\pi k}{2N} \right), \quad k = 1, \dots, N-1 \quad (3)$$

を持つ調和振動部分と非線形項の和に書かれる [6] :

$$H = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N-1} (P_k^2 + \omega_k^2 Q_k^2) + \frac{\beta}{8N} \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=1}^{N-1} \sum_{m=1}^{N-1} \sum_{n=1}^{N-1} \omega_k \omega_l \omega_m \omega_n C_{klmn} Q_k Q_l Q_m Q_n \quad (4)$$

ここで、

$$C_{klmn} = \Delta_{k+l+m+n} + \Delta_{k-l+m+n} + \Delta_{k+l-m+n} + \Delta_{k+l+m-n} \\ + \Delta_{k-l-m+n} + \Delta_{k+l-m-n} + \Delta_{k-l+m-n} + \Delta_{k-l-m-n}, \quad (5)$$

$$\Delta_r = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \cos \left(\pi r \left(\frac{2j-1}{2N} \right) \right) = \begin{cases} (-1)^s & \text{for } r = 2sN \ (s \in \mathbb{Z}) \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (6)$$

とおいた。

モード間のエネルギーの流れの規則を決めるのは C_{klmn} である。たとえば、初期にある一つのモード e を励起したとき、 $f \neq e$ を満たす全ての f に対して $C_{feee} = 0$ であるならば、モード e から他モードへは一切エネルギーは流れない。このようなモードは、Bivins 等により安定モード (stable mode) と呼ばれている [6]。このような性質は、多モード励起の場合にも拡張できる。すなわち、モードのある組を励起したとき、時間発展の過程でそれ以外のモードにエネルギーが流れないような組を考えることができる。このような組を分類するには、Poggi 等が導入した次の記法を用いるのが便利である。

Poggi and Ruffo の記法 [4]

$\mathcal{M} = \{1, \dots, N-1\}$ をモードの番号の集合とし、 \mathcal{A}_n ($|\mathcal{A}_n| = n$) を次の条件を満たす \mathcal{M} の部分集合とする：

$$C_{klmn} = 0 \quad \text{for } \forall k \in \mathcal{M} \setminus \mathcal{A}_n, \forall l, m, n \in \mathcal{A}_n.$$

FPU- β モデルの解で、初期条件

$$P_k(0), Q_k(0) = \begin{cases} \text{arbitrary} & \text{for } k \in \mathcal{A}_n \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (7)$$

を満たす解は、ハミルトニアン (4) の一部分を切り出した簡約ハミルトニアン

$$H_{\mathcal{A}_n} = \frac{1}{2} \sum_{k \in \mathcal{A}_n} (P_k^2 + \omega_k^2 Q_k^2) + \frac{\beta}{8N} \sum_{i,j,k,l \in \mathcal{A}_n} \omega_k \omega_l \omega_m \omega_n C_{klmn} Q_k Q_l Q_m Q_n \quad (8)$$

の解になる。

C_{klmn} を調べることにより、 \mathcal{A}_1 は次のように求まる。

$$\mathcal{A}_1 = \left\{ \frac{N}{2} \right\}, \left\{ \frac{N}{3} \right\}, \left\{ \frac{2N}{3} \right\}. \quad (9)$$

これらは Bivins 等が求めた安定モード¹である [6]。さらに \mathcal{A}_2 は次のように求められる [7]。

$$\mathcal{A}_2 = \left\{ \frac{N}{3}, \frac{2N}{3} \right\}, \left\{ \frac{N}{4}, \frac{3N}{4} \right\}, \left\{ \frac{N}{5}, \frac{3N}{5} \right\}, \left\{ \frac{2N}{5}, \frac{4N}{5} \right\}. \quad (10)$$

\mathcal{A}_1 の和集合は \mathcal{A}_2 になるとは限らず、 \mathcal{A}_2 の元が全て \mathcal{A}_1 になるのは $\{N/3, 2N/3\}$ だけである。

FPU- β モデルでは、初期に偶数（奇数）モードを励起すると、その後の時間発展で奇数（偶数）モードは励起されない [6]。したがって、単一モード励起の解は、全系の半分の自由度の簡約ハミルトニアンになっていることが少なくとも言える。

3 部分二自由度系の相空間構造と安定性

ここでは、簡約ハミルトニアンが二自由度になる場合について、その安定性を数値的に調べた結果を述べる。式 (10) に挙げた \mathcal{A}_2 のなかで、とくに $\{2N/5, 4N/5\}$ の簡約ハミルトニアンに注目する。 $x = Q_{2N/5}$, $y = Q_{4N/5}$, $p_x = P_{2N/5}$, $p_y = P_{4N/5}$ とおき、

$$\omega_x = \omega_{2N/5} = 2 \sin(\pi/5), \quad (11)$$

$$\omega_y = \omega_{4N/5} = 2 \sin(2\pi/5), \quad (12)$$

とおくと、簡約ハミルトニアン $H_{\{2N/5, 4N/5\}}$ は次のように書かれる：

$$\begin{aligned} H_{\{2N/5, 4N/5\}} &= \frac{1}{2} (p_x^2 + \omega_x^2 x^2) + \frac{1}{2} (p_y^2 + \omega_y^2 y^2) \\ &+ \frac{\beta'}{8} \{ 3\omega_x^4 x^4 - 4\omega_x^3 \omega_y x^3 y + 12\omega_x^2 \omega_y^2 x^2 y^2 - 4\omega_x \omega_y^3 x y^3 + 3\omega_y^4 y^4 \}. \end{aligned} \quad (13)$$

ここで、 $\beta' = \beta/N$ とおいた。図 1 に、全エネルギーの値を 1 に固定し β' の値を様々に変えたときの相空間を示した。

以下では、全系を $N = 5$ の FPU- β 系とし、図 1(a) の Poincaré 断面 ($\beta' = 1.6$) の近傍に初期点を置いた場合の時間発展を考える。すなわち初期条件として、モード 2, 4 の合計エネルギーを 1 とし、モード 1, 3 には極僅かなエネルギー ($O(10^{-20})$) を与える場合を考える。図 2 は、図 1(a) の Poincaré 断面上 $(x, P_x) = (0, 0.6)$ に初期点をおいたときのモード 1, 4 の時系列である。この場合、簡約ハミルトニアン (13) の解が、モード 1, 3 の空間では不安定であるため、これらのモードは指数的に成長する。モード 1, 3 が指数的に成長する時間 T_{exp} を、図 1(a) の Poincaré 断面の P_x 軸上の初期値に対して調べた結果を図 3 に示す。図 3 より、原点の近くにある楕円不動点と、断面の外縁付近で T_{exp} が発散する傾向が見られる。なお、この楕円不動点に相当する解は、 $\beta \rightarrow 0$ の極限で角速度 ω_y の単振動に一致する²。数値計算の範囲 ($t \leq 10^5$) で、楕円不動点の近傍 $-0.64 \leq P_x \leq 0.0$ では非励起モードの指数成長は見られなかった。図 1(a) の楕円不動点近傍の全系における安定性は、理論的な解析によって確認しなければならないが、図 3 の結果は全系における KAM トーラスの存在を示唆したものといえる。また図 3 では、安定領域と不安定領域とを分ける明確な境界があるように見えるが、そのような境界の存在を調べることも今後の課題である。

¹安定と呼ぶのは誤解を招きかねない。簡約系の解は全系において安定であるとは限らない。

²Poincaré 断面の外縁は、 $\beta \rightarrow 0$ の極限で角速度 ω_x の単振動に一致する解に対応する。

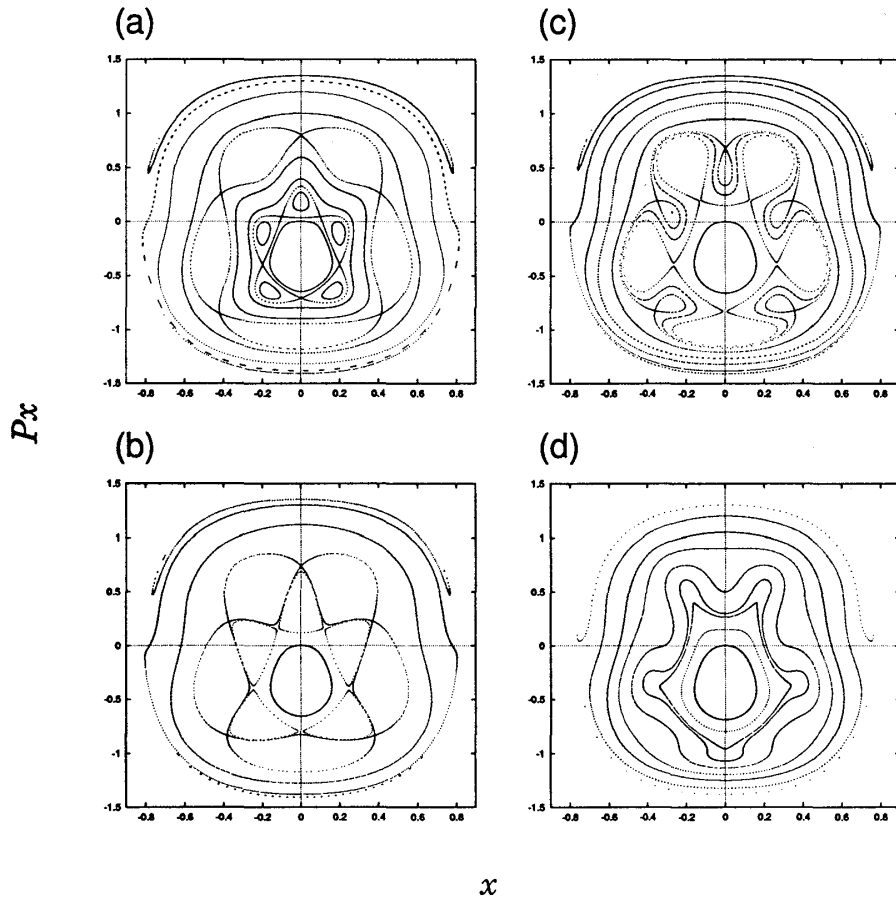


図 1. 簡約ハミルトニアン $H_{\{\frac{2N}{5}, \frac{4N}{5}\}}$ の Poincaré 断面 ($y = 0, P_y \geq 0$)
 (a) $\beta'=1.6$, (b) $\beta'=1.8$, (c) $\beta'=1.9$, (d) $\beta'=2.4$.

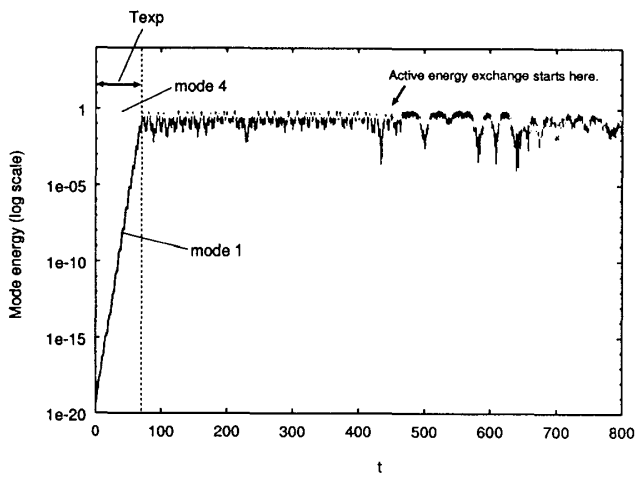


図 2. モードエネルギーの時系列

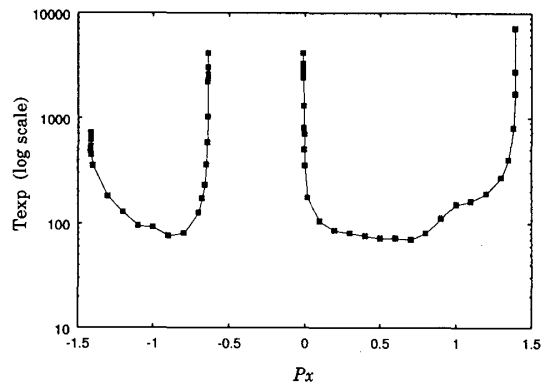


図 3. 図 1(a) の Poincaré 断面 P_x 軸上での T_{exp} の分布

初期に励起しなかったモードの指数成長は、活発なエネルギー交換が行われるための必要条件であるが、図 2 に示した結果のように、指数成長の後になかなか活発なエネルギー交換が始まらない場合がある。このような現象は、安定領域と不安定領域の境界付近の初期点に対して見られた。指数成長が終って活発なエネルギー交換が始まるまでの期間（便宜的に準安定期間と呼ぶ）について Poincaré 断面を取ってみると、図 1(a) のトーラスと交差するトーラスを描くことが分かった。このことから、準安定期間では、ある程度成長した非励起モードの影響で、エネルギーの大半を担う部分系のエネルギーがシフトし、軌道が安定領域に入って指数成長が抑えられ、再び不安定領域に入り込んだところで活発なエネルギー交換が開始されるというシナリオが予想される。

最後に簡約ハミルトニアン $H_{\{2N/5, 4N/5\}}$ の相空間構造について触れる。図 1(a) に示す Poincaré 断面では、同一周期の Poincaré-Birkhoff (PB) 鎖が二組存在するのが分かる。これらの PB 鎖が等しい回転数³を持つことは、図 1(b) で、二つの PB 鎖のセパトリクスが結合することから明らかである。図 1 に示したセパトリクスの結合・組換え現象（リコネクション現象）の発生は、PB 鎖で挟まれた領域にツイスト条件の破れがあることを意味している。ツイスト条件の破れは写像系で詳しく調べられ、極めて安定な不変トーラスを生み出すことなどが知られている [8]。FPU 系の部分構造にどの程度ツイスト条件の破れが見出されるのか、またツイスト条件の破れが多自由度系の振舞いに如何なる影響を与えるのか調べるのは今後の課題である。

4 おわりに

FPU- β モデルにおいて、初期に一部のモードの組だけを励起した場合、その解は全系よりも自由度の小さな部分系の解になることを述べた。とくに部分系が二自由度になる場合について、部分系軌道の全系における安定性を調べ、部分系の相空間構造との対応を調べた。その結果、 $\beta \rightarrow 0$ の極限で固有振動に一致する解に対応した（部分系の）楕円不動点近傍に安定な領域が見出された。

参考文献

- [1] H.Hirooka and N.Saito, J.Phys.Soc.Jpn.26 (1969) 624; N.Ooyama, H.Hirooka and N.Saito, J.Phys.Soc.Jpn.27 (1969) 815.
- [2] N.Saito, N.Hirotsu and A.Ichimura, J.Phys.Soc.Jpn.39 (1975) 1431.
- [3] K.Yoshimura, Phys.Rev.E54 (1996) 5766; *ibid* 59 (1999) 3641; *ibid* 62 (2000) 6447.
- [4] P.Poggi and S.Ruffo, Physica D103 (1997) 251.
- [5] E.Fermi, J.Pasta and S.Ulam, Los Alamos Report LA1940 (1955), reproduced in: Lecture Notes in Applied Mathematics, vol.15 (AMS, 1974) 143.
- [6] R.L.Bivins, N.Metropolis and J.R.Pasta, J.Comput.Phys.12 (1973) 65.
- [7] S.Shinohara, *in preparation*.
- [8] S.Shinohara and Y.Aizawa, Prog.Theor.Phys.100 (1998) 213, and references therein.

³ここでの回転数とは、 P_x 軸上にある楕円不動点のまわりの回転数を指す。